

製品紹介

統合化リートベルト解析システム FAT-RIETAN の世界 — 理学版のユーザーへのメッセージ —

泉 富士夫*

リートベルト解析プログラム RIETAN は、角度分散 X 線回折 (SR 光も含む)、角度分散中性子回折、TOF 中性子回折のいずれの方法で測定した強度データも、ほとんど同一の手順で解析できる世界で唯一のソフトウェアである^{(1),(2)}。計算機能が豊富で、コンピューターや結晶解析の初心者にも親しみやすく、ユーザーの能力・経験をコンピューターが補ってくれるよう工夫されていることから、事実上、日本におけるリートベルト解析プログラムのデファクト・スタンダードとしての地位を築いており、大半の教育・研究機関と民間企業が RIETAN を採用している。

RIETAN が誇ってよいのは、極めて懇切丁寧なマニュアルが付属していることだ。角度分散用 RIETAN のマニュアルだけでも、約 110 ページに達している。これほど徹底したドキュメンテーションを実施している結晶学関連プログラムは、我が国ではまれな存在といってよいだろう。このマニュアルは、初心者から結晶解析のエキスパートに及ぶ、広い範囲のユーザーが必要とする情報を、くまなく提供するべく細心の注意を払っているほか、通常の操作手引書の範疇を越えた詳細な記述さえ含んでいる。中でも、RIETAN を使うにあたって最低限必要となる結晶学の知識—“International Tables”的読み方、対称操作、複合格子、同位位置、温度因子とはなしにか、etc.—を、例を挙げながらやさしく記述してあるのは、従来の結晶学に関係したソフトウェアではまったく手を抜いていたことであり、大変好評を博している。これ以外に、プログラムの最新版に関する詳しい解説⁽³⁾も入手できる。

旧版 RIETAN の最大の弱点は、それが「孤立無援の」ソフトウェアであり、ほかの結晶学的計算プログラムと接続されていないため、周辺プログラムを使用する際に、対称操作や原子名などの基本入力データや解析結果—構造パラメータ、格子定数及びそれらの標準偏差—

を、ユーザーが再入力せざるを得ないことだった。リートベルト解析により精密化されたパラメーターは、無表情な数字に過ぎない。フーリエ(D)合成で構造モデルの妥当性をチェックし、原子間距離や結合角を求め、結晶模型を作図することによって、初めて解析した結晶構造の全貌が理解できるのは言うまでもない。しかし上記のデータを再入力することは、恐ろしく煩わしい「よごれ仕事」であることから、筆者自身を含めた RIETAN のユーザーは、周辺ソフトウェアの利用をつい怠ってしまうのが常だった。これでは長時間を費やして強度データを収集し、解析した意味が薄れてしまう。

理学電機が、RIETAN のメニュー・オペレーション化の作業に取り掛かったのは 1987 年の暮れのことである。筆者は次第にできあがってくるメニューをチェックして、改良すべき点を次々に指示した。時を経ずして気づいたのは、種々の周辺ソフトウェアも整備し、解析結果を再入力することなしに実行できるようにしなければ、RIETAN は商用ソフトウェアとしての存在意義の大半を失うということである。メーカー側が、こういったソフトウェアを提供しないとすると、結晶解析に関する過去の蓄積がない限り、ユーザーがみずから用意するのは難しい。たとえ自前で調達できたとしても、回折装置に接続されているコンピューター上に移植し、メニュー・オペレーション化したり、RIETAN と接続したりすることはほとんど不可能に近い。こういった周辺ソフトウェアは、大型コンピューター上で RIETAN を走らせているユーザーにとっても有用であろう。そこで翌年の 6 月頃から FAT-RIETAN (肥満体の RIETAN) という開発コードをつけ、リートベルト解析システムの統合化に着手した。同時に、RIETAN 本体の内容—特に種々の結晶学的数据の出力機能—にもいっそう磨きをかけるべく努力した。超伝導フィーバーの余波で多忙だったこともあり、研究の合間にぬってのプログラミングは遅々として進展しなかったが、1989 年 2 月によく最終作業である ORTEP II との接続を終了し、

* 無機材質研究所

RIETAN は、スタンドアローンの素朴なソフトウェアから、統合的なシステムへと生まれ変わった。

理学版 FAT-RIETAN システムでは、次に例挙するソフトウェア (①~⑥) と、データベース (⑦~⑨) が有機的に結びつき、一つの調和した統合環境を作り出している。すなわち、ユーザーの成長に応じて、リートベルト解析や粉末回折パターンのシミュレーションばかりでなく、ほかの結晶学的計算にも容易にチャレンジできるような環境がここに整備されたのである。

① RIETAN

粉末X線回折データのリートベルト解析をお行う。構造がすでに解析されている化合物の粉末回折パターンをシミュレートすることもできる。

② GENREF

空間群既知の物質の回折指標とピーク位置を計算する。得られたピーク位置を実測パターンと照合させ、ピークの指標や不純物の有無を調べることもできる。

③ FRS

リートベルト解析の結果から推定した F_0 を基にフーリエ合成と D 合成を行い、等高線図 (contour map) を作図する。

④ ORFFE

原子間距離と結合角を計算する。標準偏差の計算法が厳密なのが特長。

⑤ ORTEP II

結晶構造模型を作図する。機能が驚くほど豊富であり、異方性熱振動の表現に優れている。FAT-RIETAN では、結晶模型作図用のマクロ命令を PRETEP という前処理プログラムで ORTEP II 用の命令に翻訳するという 2 段がまえの構成をとっている。

⑥ LATDEN

Ewald の方法により格子エネルギーを計算する。

⑦ SPGRI

“International Tables”, Vol. I に記載されている 230 の空間群に関する諸情報を収録したデータベース。

⑧ SPGRA

“International Tables”, Vol. A に記載されている 230 の空間群に関する諸情報を収録したデータベース。

⑨ ASFDC

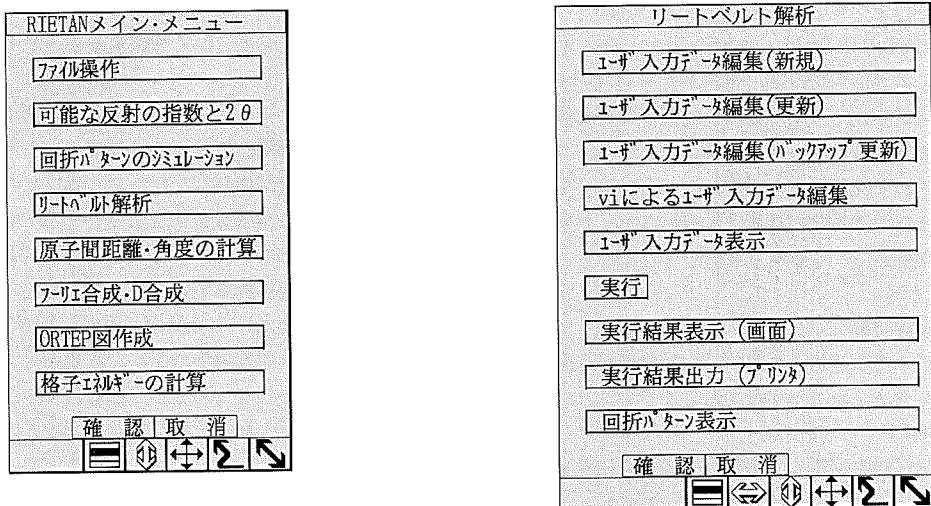
原子散乱因子を計算するための係数、異常分散の補正項、原子量を収録したデータベース。このほか、名種ファイルの複写、削除、変換などを効率よく行なうためのファイル・マネージャーも備わっている。これらのプログラムは、すべてメニュー・オペレー

ション (Fig. 1) を採用しているので、ユーザーは、FAT-RIETAN の背後で動いているオペレーティング・システムの存在をまったく意識することなく、解析だけに専念できる。

メニュー・オペレーションの最大の欠点は、プログラムの使い方に習熟してくるにつれて、マウスを使用したメニューの選択が煩わしくなってくること、プログラムの機能をフルに活用できなくなるケースがしばしば出てくることだ。特に RIETAN や ORTEP II のように非常に多くの機能が利用でき、しかも入力データの量が多いプログラムでは、この傾向が強い。理学版 RIETAN は、入力データの再編集の際に、任意の入力箇所にジャンプできるようにしてあるが (Fig. 1 (c)), それでも後者の問題は解決したことにならない。そこでこれら二つのプログラムについては、フルスクリーン・エディター (vi あるいはオプションで Hitachi Editor) により、ユーザーが入力ファイルを直接、編集することもできるよう留意した。

ここで強調しておきたいのが、FAT-RIETAN システムの教育的意義である。RIETAN 及び周辺ソフトウェアは、位相問題を解くという重要な解析過程⁽⁴⁾が抜けていることを除けば、単結晶 X 線解析で必要となる結晶学的計算の大半を含んでいる。したがってこれらのソフトウェア群は、材料の開発や物質の同定に役立つばかりでなく、初学者が結晶学の基礎を身に付けるためのツールとしても有効であるに違いない。高価な 4 軸型単結晶 X 線回折装置を所有している一にぎりの人々ばかりではなく、粉末回折装置をルーチンに使用している人たちにも、RIETAN を通じて結晶学に親しみ、自分自身の研究や仕事に役立てもらいたい—と筆者は以前から切望していた。RIETAN は、9000 行近くある巨大なプログラムである。しかも演算速度を上げるために、大きな配列をふんだんに使っている。このため、従来の 16 ビットのパーソナル・コンピューター上ではとうてい実行できず、強度データを大型コンピューターに転送して解析せざるを得なかった。ファイルの取扱いが面倒くさく、エディターの機能が貧弱であり、呪文のような JCL が必要となる上、高額の使用料を付けようしゃなく徴収される大型コンピューターに頼らざるを得ないのでは、いくら優れたソフトウェアでも、広く一般に普及させるのは無理である。このため、回折装置のコンピューター上で RIETAN を走らせることは当分できない—と思いつこんでいた。

理学電機は RINT の開発にあたって、どのようなコンピューターを採用したらよいかいろいろ検討したが、社内の意見が一致しないまま、懸案として残っていた。1987 年 6 月に、筆者が理学を訪れる機会があったとき、RINT 用コンピューターの選定について相談が持ちか

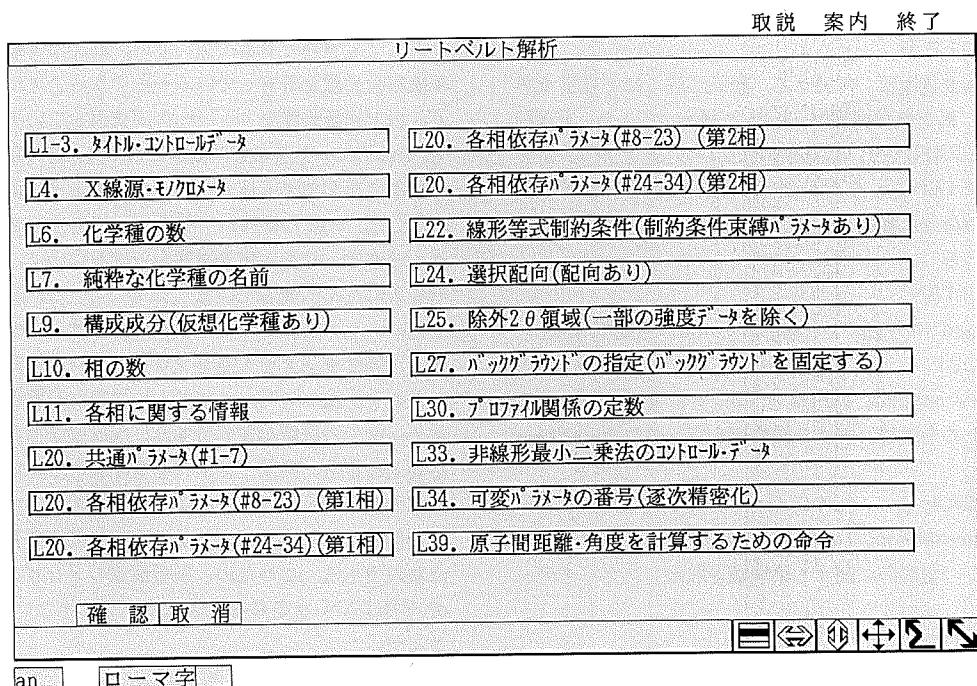


an ローマ字

(a) メイン・メニュー。

an ローマ字

(b) リートベルト解析メニュー。



(c) ユーザー入力データ編集メニュー。

Fig. 1 理学版 FAT-RIETAN システムのメニュー画面。

けられた。そのとき筆者は、UNIXをオペレーティング・システムとする32ビット・ワークステーションの採用を、一も二もなく推薦した。UNIXは「枯れた」OSなので、バグに苦しむことなく安心して使える上、マルチタスク・マルチウィンドウ機能を持っていることから、計測とデータ処理を、別のウィンドウ上で同時に実行するのに適しているためである。最も、RIETANを何とかメーカー機に移植したいという下心も若干あつたことは否定できない。驚いたことに、その日のうちに理学は、32ビットUNIXマシンを、RINTの計測・制御・データ処理装置として採用するという決断をいち早く下してしまった。そのおかげで、かなりの労力は払ったものの、マルチウィンドウ・マルチタスク機能を利用して、回折データを測定しながら、リートベルト解析が行えるようにしたいという、かねてからの悲願を、ここに達成することができた。FAT-RIETANシステムの完成によって、さまざまな結晶学的計算(作図)がメニュー・オペレーションによりその場で実行できるようになったことの意義は、はかりしれないほど大きい。

理学版FAT-RIETANシステムは筆者と理学電機が共同で開発し、出来映えや使い勝手を徹底的にチェックした製品であり、現在のところ原版の著作者として安心して推薦できる唯一の商用ソフトウェアである。これか

ら開発者の手を離れ、ユーザーのもとでルーチンに使用されていくわけだが、その過程で多くの改良すべき点が浮かび上がって来るに違いない。これからもユーザーからの要望と、新たな解析方法を積極的に取り入れることによって、より親しみやすく、洗練されたソフトウェアに育成していく、粉末回折の利用者と結晶学を結ぶ架け橋として評価されるように熟成させたいーと思う。実際に使用され、問題点やバグを見出された方は、ぜひご意見・情報を寄せ頂きたい。できる限り対処していくつもりである。

最後に、実際のメニュー・オペレーション化を担当して頂いた理学電機、設計部の齊藤雅彦氏に心からご苦労様と言いたい。氏は筆者の微に入り細にわたる注文を受け入れ、全体で7000行にも及ぶプログラムをC言語で作成したのである。

文献・脚注

- (1) 泉 富士夫, 日本結晶学会誌, 27, 23 (1985).
- (2) F. Izumi, H. Asano, H. Murata and N. Watanabe, J. Appl. Crystallogr., 20, 411 (1987).
- (3) F. Izumi, Rigaku J., 6, (1989).
- (4) 位相問題を解決するといっても、ほとんどの4軸回折装置のユーザーは、単に直接法のプログラムを「black box」として利用しているだけで、別に高度な結晶学的知识を駆使しているわけではない。